



TITLE:

HOPG基板上における分子配列のモデリング

AUTHOR(S):

西谷, 暢彦

CITATION:

西谷, 暢彦. HOPG基板上における分子配列のモデリング. 京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステム研究成果報告書 2017, 2016: 44-44

ISSUE DATE:

2017-03

URL:

<http://hdl.handle.net/2433/227976>

RIGHT:

HOPG 基板上における分子配列のモデリング
Model study of molecular ordering on HOPG surface

京都大学工学研究科 合成・生物化学専攻 西谷 暢彦

研究成果概要

分子を構成単位とするナノデバイスの構築に向けて、固液界面における分子の自己組織化が注目されている。固液界面では溶液を平面基板上に滴下するだけで自発的に分子配列を形成できるという簡便性がある。本研究ではオクタン酸/高配向性熱分解グラファイト (HOPG) 界面における分子配列形成挙動を走査トンネル顕微鏡 (STM) を用いて観察した。

長鎖アルキルと水素結合部位を有する棒状化合物 **1u–3u** を設計・合成し、置換基の種類や位置が、固液界面における分子配列の形成濃度や配列形状に与える影響について調査した (Figure 1a)。それぞれのオクタン酸溶液を調製し、オクタン酸/HOPG 界面における配列形成を STM により観察した結果、ヒドロキシフェニル基を有するウレア誘導体 **2u** について異方的なドメイン成長が観察された (Figures 1b and 1c)。この異方的なドメイン成長の原因を調査するために、得られた配列像及び配列の格子定数を参考にし、Materials Studio を用いた MM/MD 計算により分子配列モデルを作成した (Figures 1d–1g)。最適化した分子モデルから、**2u** の配列中のウレア・ヒドロキシ基はそれぞれ水素結合を形成しており、ドメイン長軸方向と水素結合方向が一致していることが分かった。これらの結果より、**2u** の配列形成プロセスにおいて、配列カラム内方向の吸着速度がカラム間方向の吸着速度よりも速いことが示唆された。

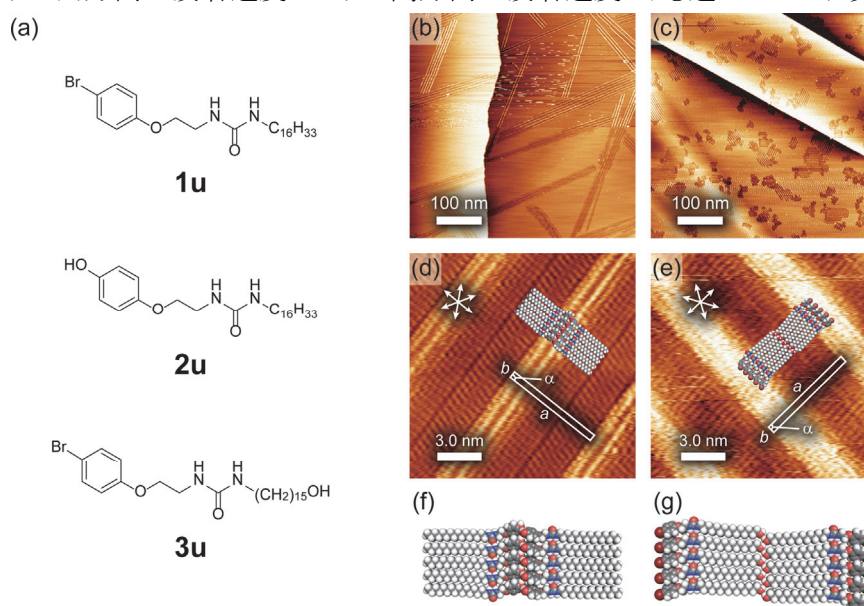


Figure 1. (a) Molecular structures of **1u–3u**. STM images of (b) **2u** and (c) **3u**. High-resolution STM images and molecular models of the 2-D ordering of (d) **2u** and (e) **3u**. Enlarged molecular models of (f) **2u** and (g) **3u**, which were simulated by MM/MD calculations.